

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۲۷ / ۵ / ۱۳۸۲



دانشگاه علم و صنعت ایران

دانشکده فیزیک

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تهیه مدارک

محاسبه نمای لیپانوف و آنتروپی

کولموگروف-سینای در گره‌های سخت

رضا براتی

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک

استاد راهنما:

دکتر سید مسعود جزایری

بهمن ۱۳۸۱

۴۷۷-۱

تقدیم ناچیز به :

پدر و مادر

چکیده

ابتدا مفاهیم اساسی شبیه‌سازی مستقیم مونت کارلو (DSMC) توضیح داده شده است و سپس به خواص آشوبی کره‌های سخت پرداخته‌ایم و روابط نمای لیپانوف و آنتروپی کولموگروف و سینمای (KS) برای این کرات از طریق نظری محاسبه شده است. در پایان با استفاده از روش DSMC نمای لیپانوف و آنتروپی KS برای کرات سخت محاسبه و با روش دینامیک ملکولی (MD) مقایسه می‌شود.

وظیفه خویش می‌دانم که از زحمات صادقانه و تلاش‌های
ارزشمند استادان کراتقدر، بویژه از استاد راهنمای خود
جناب آقای دکتر جزایری تشکر نمایم.

فهرست مطالب

ردیف	عنوان
فصل اول	
۲	(۱-۱-) معرفی عدد Kn
۳	(۲-۱-) روش CFD
۴	(۳-۱-) روش (Detorministic Simalation)
۶	Probabilistic Simulation (۴-۱-)
۹	Acceptance-Rejection قاعده (۵-۱-)
۱۱	(۶-۱-) بحث فرکانس برخورد و طول پویش آزاد در کره‌های سخت
۱۴	(۷-۱-) جمع‌بندی روش DSMC در کره‌های سخت
فصل دوم	
۱۹	(۲-۱-) مقدمه
۲۵	(۲-۲-) دینامیک مسئله
۲۷	(۳-۲-) الگوریتم و مدل‌ها
۲۹	(۱-۳-۲-) برخورد یک ذره ۲ بعدی با یک سطح تخت
۳۱	(۲-۳-۲-) برخورد یک ذره ۲ بعدی با یک سطح خمیده
۳۳	(۳-۳-۲-) گاز شامل N دیسک سخت

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

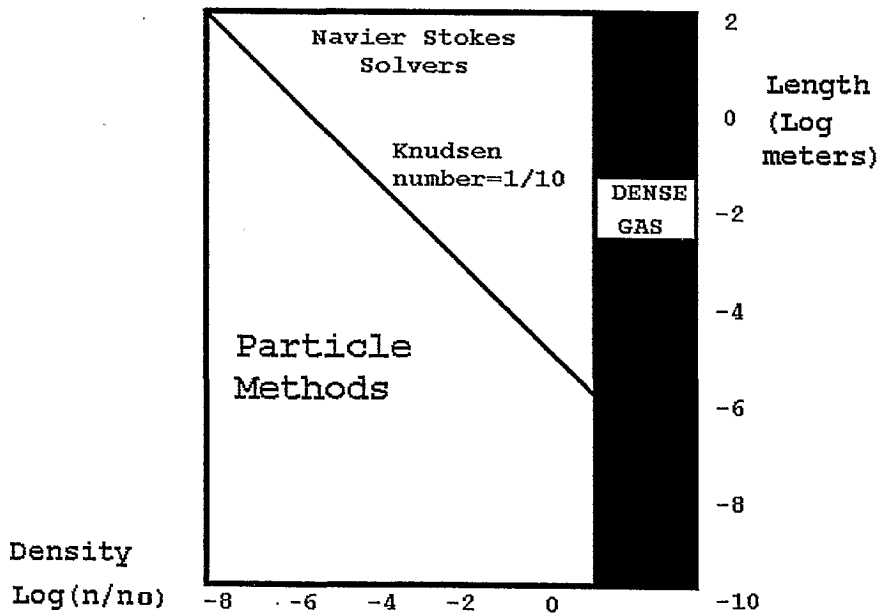
۳۸	(۴-۲) آنترپی کولموگروف و سینای (Kolmogrov-Sinai) در سیستم کره‌های سخت
۴۶	(۵-۲) Mixing و ناپایداری لیاپانوف و زمان واهلش
	فصل سوم
۵۱	مقدمه
۵۱	(۱-۳) تابع تولید رندوم
۵۳	(۲-۳) تابع توزیع اولیه (ماکسول - بولتزمن)
۵۷	(۳-۳) تابع توزیع زمانی
۵۹	(۴-۳) دینامیک مسئله
۶۷	پیوست (۱)
۸۴	پیوست (۲)

فصل اول

روش DSMC

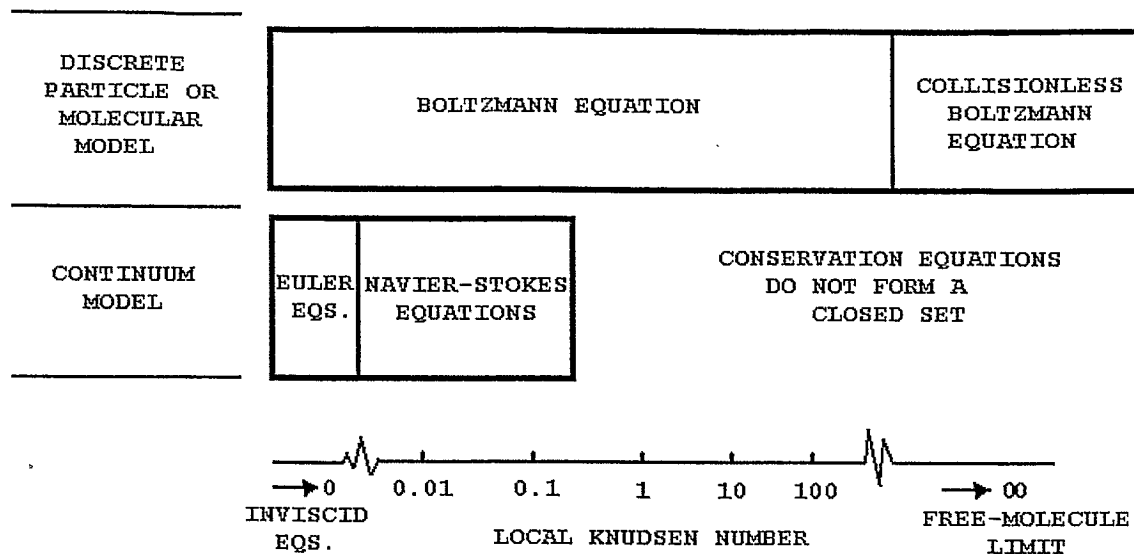
(۱-۱) معرفی عدد Kn :

در بررسی دینامیک شاره‌ها و شاره‌ها را عموماً به ۲ دسته تقسیم می‌کنیم شاره پیوسته و شاره گسسته. معادله ناویراستوکس برای سیستم‌های پیوسته به کار می‌رود. اگر سایز سیستم از مرتبه L باشد و اگر λ متوسط طول پویس آزاد شاره‌ها باشد. در این صورت عدد (Kn) (*Knudsen number*) برابر است با $Kn = \frac{\lambda}{L}$ و این عدد روشن می‌کند که آیا شاره پیوسته است یا گسسته. چنانچه $Kn < 0.1$ باشد شاره را پیوسته و اگر $Kn > 0.1$ باشد شاره را گسسته در نظر می‌گیریم.



شکل (۱-۱)

لازم به ذکر است که در هر ۲ حالت مسئله با معادله بولتزمن قابل حل است.



شکل (۲-۱)

اما مسئله این است که حل معادله بولتزمن در حالت کلی می‌تواند بسیار مشکل باشد. و برای سیستم‌هایی که اندکی پیچیده باشند تقریباً غیرممکن است. البته روش عددی برای حل معادله بولتزمن موجود است. مانند روش *CFD*، اما به دلیل مشکلاتی که ذکر خواهد شد چندان مطلوب نیست. روش‌های تحلیلی عموماً برپایه حل معادله بولتزمن استوار است. اما روش‌های عددی عموماً برپایه فیزیک شارها و نه بر مبنای مدل‌های ریاضی است. اما به هر حال سعی خواهیم کرد یک ارتباط بین این ۲ روش ایجاد کنیم.

(۲-۱) روش *CFD* (Computational fluid dynamics) :

این روش بیش از سایر روش عددی به حل معادله بولتزمن نزدیک است. اما

اشکال کار در این است که یافتن مرزهایی در فضای سرعت‌ها به نحوی که تعداد کمی از ملکول‌ها در خارج این مرزها قرار گیرند بسیار مشکل است. به‌خصوص در دماهای بالا، چرا که تعداد بسیار کمی از ملکول‌ها درون مرزهای گفته شده به مدت طولانی باقی می‌مانند. اگر شماره ۳ بعدی باشد احتیاج به ۶ بعد در فضای فاز داریم. اگر شارش مانا نباشد، باید زمان نیز به همراه سایر متغیرها وارد محاسبه شود.

برای حل عددی معادله بولتزمن از طریق روش‌های تفاضل محدود یا المان‌های محدود، اگر هر بعد را به ۱۰۰ قسمت کنیم کلاً احتیاج به 10^{14} المان داریم. و تازه این در شرایطی است که دارای گاز ساده باشیم. در شرایطی که واکنش‌های شیمیایی یا تابش گرمایی داشته باشیم، حل معادله بولتزمن از این طریق بسیار دشوار خواهد بود. بنابراین با توجه به این مشکلات بی‌سبب نیست که حل معادله بولتزمن از این روش محدود به گازهای تک اتمی و شماره‌هایی با شکل هندسی ساده می‌شود.

(۱-۳) Deterministic Simulation

این روش (MD)، یک گاز واقعی، با تعداد زیادی از ملکول‌ها را مدل‌سازی می‌کند. این تعداد از مرتبه چند صد تا (در کامپیوترهای قدیمی)، تا مرتبه چند میلیون تا (در شبیه‌سازی‌های جدید) است. مولفه‌های مکان، مولفه‌های سرعت و حالت‌های اولیه هر یک از ملکول‌های شبیه‌سازی شده شماره در کامپیوتر ذخیره می‌شود و با زمان دینامیک پیدا می‌کنند. پارامتر زمان وارد شده در شبیه‌سازی می‌تواند همان زمان واقعی شارش باشد.

روش MD (دینامیک ملکولی) اولین روش شبیه‌سازی فیزیکی بود. از آنجایی که این متد با قراردادن پیکربندی اولیه به کار برده می‌شود، محاسبه نتایج حرکت ملکولی شامل برخوردها کاملاً *deterministic* هستند. برخوردها زمانی واقع می‌شوند که سطح مقطع برخوردها روی هم بیفتند (*Overlap*). تعداد ملکول‌های شبیه‌سازی شده به دلخواه نیست. پارامتری که بهترین توصیف را برای تعداد ملکول‌ها در یک شاره ارائه می‌دهد، تعداد ملکول‌های موجود درون مکعبی به ضلع طول پویش آزاد قرار داده برای ملکول‌هایی با قطر تقریبی $(m) \times 10^{-10} \text{ m}$ این تعداد برابر است

$$N_{\lambda} = n\lambda^3 = 3856(n/n)^2 \quad (1-1)$$

که n دانسیته تعداد ذرات در شرایط استاندارد. مثلاً برای مسئله‌ای به صورت یک شاره ۳ بعدی که در هر جهت به اندازه ۳۰ برابر طول پویش آزاد گسترده شده است در حدود 10^8 ملکول شبیه‌سازی شده در شرایط استاندارد لازم است.

محاسبات به روش MD با در نظر گرفتن قطر واقعی به گازهای چگال محدود می‌شود (درست برعکس معادله بولتزمن که به گازهای رقیق محدود می‌شود و برای چگالی‌هایی است که بیش از ۲ برابر چگالی استاندارد نیستند). از سوی دیگر برای $\frac{n_0}{n}$ برابر 10^{-6} ، از معادله (۱-۱) تعداد ملکول‌های لازم برای شبیه‌سازی در حدود 10^{20} است که خطای برنامه‌نویسی را به شدت بالا می‌رود.

(۱-۴) : Probabilistic Simulation method

اولین روش شبیه‌سازی از این نوع در (1962) به وسیله هاویلند - لاولین ابداع شد. اما در این متن به بررسی نوع خاصی از این روش به نام *Direct Simulation Monte Carlo* (شبیه‌سازی مستقیم به روش مونت کارلو) می‌پردازیم.

روش *DSMC* با فرض رقیق بودن گاز آغاز می‌شود و برای چگالی‌های زیاد و پلاسماهای یونیزه شده و بر همکته‌های بلندبرو کاربرد ندارند. منظور از شبیه‌سازی مستقیم همان مدل‌سازی مسائل فیزیکی با در نظر گرفتن ماهیت کاتوره‌ای است. و *DSMC* روشی است که در بازه زمانی کوچکی حرکت ملکول‌ها و برخوردهای بین ملکولی را مدل‌سازی می‌کند. این بازه می‌بایستی در مقایسه با زمان متوسط برخوردها بسیار کوچک باشد. ممکن است با در نظر گرفتن تقارن در فضای فیزیکی تعداد ابعاد سلول را کم کنیم، اما برخورد را همیشه به صورت یک پدیده ۳ بعدی در نظر می‌گیریم. باید توجه کرد که مکان‌ها و سرعت‌های ملکول‌هایی که شبیه‌سازی شده است به صورت پیوسته توزیع شده است و قوانین پایستگی جرم، انرژی و تکانه می‌بایستی در هر برخورد اعمال شود. اندازه ملکول‌های شبیه‌سازی شده با اندازه ملکول‌های واقعی یکی می‌باشد. توزیع مشخصی برای سرعت‌ها در نظر می‌گیریم و ناحیه شبیه‌سازی شده فضای فیزیکی به تعدادی سلول تقسیم می‌کنیم. این سلول‌ها می‌توانند نواحی کوچک با مرزهای مشخص یا یک آرایه از نقاط باشند.

یک ملکول درون یک سلول خوانده می‌شود هرگاه که در نزدیکترین فاصله به نقطه‌ای باشد که سلول را مشخص می‌کند. Δx یا ابعاد سلول را باید به نحوی انتخاب کنیم که شاره عبوری در طول حرکت در یک سلول تغییر چندانی نکند. هر سلول را به تعدادی زیرسلول تقسیم کرده و هر زوجی که در برخورد شرکت می‌کنند از یک زیرسلول انتخاب می‌شوند. احتمال یک برخورد بین ۲ ملکول در گاز متناسب با حاصلضرب سرعت نسبی (C_r) و σ_T (سرعت مقطع کل برخورد) باشد. و با استفاده از رابطه $N_c = \frac{1}{2} n^2 \overline{\sigma_T c_r}$ که تعداد کل برخوردها در واحد زمان در واحد حجم است. و تعداد برخوردها در هر سلول در طول بازه زمانی Δt برابر است با $N_c \Delta t$ است. مقدار متوسط $\sigma_T C_r$ در هر سلول محاسبه شده و ماکزیمم آن تعیین می‌شود.

زوج‌های برخورد با استفاده از قاعده *acceptance - rejection* انتخاب می‌شوند. در هر سلول زمان این فرآیند (فرآیند برخورد) متناسب با توان دوم تعداد کل ملکول‌های موجود در هر سلول است. این پروسه تکرار می‌شود تا این که زمان به اندازه زمان واقعی عبور شاره از سلول شود. این پروسه بهترین بهینه‌سازی را سبب می‌شود. مع الوصف در شرایطی که دارای حالت غیر تعادلی شدید هستیم (مثلاً در نزدیکی یک موج شوکی) این پروسه اندکی تغییر می‌کند.

یک سلول با حجم V_c را در نظر بگیریم که هر سلول شبیه‌سازی شده نماینده F_N سلول واقعی باشد، در این صورت، P احتمال برخورد بین ۲ ملکول شبیه‌سازی در بازه زمانی Δt برابر است با $P = F_N \sigma_T C_r \Delta t / V_c$. سرعت نسبی C_r با انتخاب زوج برخورد

و سطح مقطع کل (σ_T) عموماً یک تابع از سرعت نسبی است. اما بقیه کمیت مستقل از انتخاب زوج برخوردها است.

متوسط تعداد ملکول‌های واقعی در سلول nV_c است و متوسط تعداد ملکول‌های

شبیه‌سازی برابر است $N = nV_c / F_N$ ، که n چگالی گاز واقعی است. تعداد کل برخورد در

هر سلول $\frac{N(N-1)}{2}$ زوج است (البته با در نظر گرفتن احتمال برخوردها). این روش در

DSMC استفاده می‌شود اما این روش چندان کارآمد نیست. بهینه‌ترین حالت زمانی

بدست می‌آید که P_{\max} برابر واحد باشد یعنی $P_{\max} = F_N (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t / V_c$ و تعداد زوج

انتخابی در واحد زمان با ضرب این رابطه در $\frac{N^2}{2}$ بدست می‌آید. اما بهتر است این

حاصلضرب به صورت $\frac{1}{2} N \bar{N} F_N (\sigma_T C_r)_{\max} \Delta t / V_c$ نوشته شود که همان تعداد زوج‌های

انتخابی از هر سلول است در هر پله زمانی و برخورد با احتمال $\frac{\sigma_T C_r}{(\sigma_T C_r)_{\max}}$ رخ بدهد.

اگر N دوبرابر شود F_N نصف خواهد شد و تعداد زوج‌های انتخابی ۲ برابر می‌شود

یعنی این که زمان محاسبه شده با N متناسب است. در حالتی که گاز مخلوط موجود باشد

می‌بایستی اتمام ذرات را یکسان فرض کنیم. اما مشکل، زمانی بروز می‌کند، که تفاوت

جرم‌های موجود در مخلوط زیاد باشد. زیرا برخوردهایی که شامل ذرات سبک باشد دارای

سرعت‌های نسبی بسیار زیادی خواهد بود و از آنجایی که احتمال برخورد $\frac{\sigma_T C_r}{(\sigma_T C_r)_{\max}}$

است میزان پذیرش ملکول‌های سنگین بسیار اندک می‌شود. راه‌حل مناسب این است که

فرمول‌های و به صورت زیر تصحیح شود.